

### **Список источников и литературы**

1. Бурдые П. Практический смысл. СПб.: Алетея, 2010.
2. Bourdieu P. Language & Symbolic Power. Polity Press. 1991.
3. Fitzpatrick M. How Europeans view tactical nuclear weapons on their continent // Bulletin of the Atomic Scientists. 2011. 67:57.
4. Frey K. Nuclear Weapons as Symbols. The Role of Norms in Nuclear Policy Making. [Электронный ресурс]. URL: <http://www.scribd.com/doc/24791658/NUCLEAR-WEAPON-AS-SYMBOLS>
5. Harrington de Sanatana A. Nuclear weapons as the currency of power // The Nonproliferation Review. 16:3. P. 325–345.
6. Malcom Chalmers, Lunn S. NATO's Tactical Nuclear Dilemma // Occasional Paper. Royal United Service Institute, 2010.
7. Martin Butscher, Nassauer O., Young S. Nuclear Futures. Western European options for nuclear risk reduction. BASIC-BITS Research Report 98.5.
8. NATO nuclear reform off the menu in Tallinn // NATO Watch. No 9. May 2010. [Электронный ресурс]. URL: [http://www.natowatch.org/sites/default/files/NATO\\_Watch\\_Observatory\\_No.9\\_0.pdf](http://www.natowatch.org/sites/default/files/NATO_Watch_Observatory_No.9_0.pdf)
9. Rogers R. R. Common Security: a Psychological Concept // The Psychodynamics of International Relationships. Vol. 1. Concepts and Theories. Lexington: Lexington Books, 1990.

***К. А. Некрасов, Н. В. Кичигина, А. Я. Купряжкин,***  
Физико-технический институт УрФУ, г. Екатеринбург

### **Выход радиогенного ксенона из оксидного топлива ядерных реакторов: моделирование методом молекулярной динамики**

Изотопы ксенона являются одними из наиболее вероятных продуктов распада ядер урана-235 (как и других делящихся ядер) в результате деления нейтронами при работе ядерного реактора. Образование пузырьков ксенона в объеме реакторных материалов может приводить к ухудшению их эксплуатационных характеристик, тогда как выход ксенона из топлива увеличивает давление под оболочкой

ТВЭЛов, что создает предпосылки для растрескивания оболочек. Соответственно, образование ксенона в топливе ядерных реакторов представляет собой один из процессов, лимитирующих длительность нахождения тепловыделяющего элемента в активной зоне, а вместе с этим — и глубину выгорания топлива. Получение новых данных о механизмах и характеристиках процессов растворения и переноса ксенона в кристаллах оксидного топлива ядерных реакторов может способствовать разработке методов увеличения продолжительности кампании реактора и глубины выгорания топлива.

Экспериментальное изучение процессов переноса ксенона в условиях эксплуатации ядерного горючего (облучение, высокие температуры) затруднено, чем обусловлена актуальность вычислительного моделирования таких процессов. Одной из востребованных технологий такого моделирования на молекулярном уровне является метод молекулярной динамики, обеспечивающий как высокую скорость расчета, так и возможность получения результатов с количественной точностью.

До сих пор работы по молекулярно-динамическому моделированию ксенона в оксидном топливе (преимущественно в диоксиде урана  $\text{UO}_2$ ) ограничивались рассмотрением состояния пузырьков ксенона (см. напр. [5]), перехода атомов Хе из пузырька в кристаллическую решетку [5], диффузии ксенона вдоль границ зерен [2]. Моделирование же состояния и миграции одиночных атомов ксенона в объеме кристаллической решетки оксидного топлива ( $\text{UO}_2$ ,  $\text{PuO}_2$ ,  $\text{ThO}_2$ ) проводилось только статическими методами (см. напр. [3]). Отсутствие динамического моделирования было обусловлено чрезвычайно низкой подвижностью атома ксенона, внедренного в кристаллическую решетку.

В настоящей работе для проведения молекулярно-динамического моделирования использовались высокоскоростные поточно-параллельные расчеты на графических процессорах архитектуры CUDA, аналогичные [1]. Благодаря ускорению моделирования, реализована миграция одиночных атомов ксенона в стехиометрических модельных кристаллах диоксида урана  $\text{UO}_2$ .

Модельными системами в настоящей работе были октаэдрические нанокристаллы диоксида урана из 5460 ионов (1820 молекул  $\text{UO}_2$ ), изолированные в вакууме (имеющие свободную поверхность).

Атом ксенона перед началом моделирования размещался в одной из центральных междоузельных позиций, откуда он быстро переходил в катионную вакансию. Интегрирование уравнений движения проводилось обычным для молекулярной динамики методом Эйлера с полшагом по формулам

$$\begin{aligned}\vec{v}_i(t + \Delta t/2) &= \vec{v}_i(t - \Delta t/2) + (\vec{F}_i/m_i) \cdot \Delta t, \\ \vec{r}_i(t + \Delta t) &= \vec{r}_i(t) + \vec{v}_i(t + \Delta t/2) \cdot \Delta t,\end{aligned}\tag{1}$$

где  $\vec{r}_i$  и  $\vec{v}_i$  — координаты и скорость  $i$ -й частицы,  $m_i$  — ее масса,  $\vec{F}_i$  — действующие на частицы результирующие силы, которые рассчитывались в приближении парных потенциалов взаимодействия точечных ионов (частицы  $i, j$ ) как

$$\vec{F}_i(\vec{r}_i) = \sum_{j \neq i} \bar{\Delta} U_{ij} \left( \left| \vec{r}_i - \vec{r}_j \right| \right).\tag{2}$$

Для собственных ионов диоксида урана использовались эмпирические парные потенциалы  $U_{ij}$ , предложенные в работе [1], где они были восстановлены из полной зависимости постоянной решетки кристаллического  $\text{UO}_2$  от температуры. Взаимодействие атома ксенона с ионами урана и кислорода описывалось потенциалами, рассчитанными в работе [3].

Шаг интегрирования  $\Delta t$  составлял  $3 \cdot 10^{-15}$  с. Модельные времена эволюции системы достигали  $3 \cdot 10^{-7}$  с, то есть 100 млн. шагов.

Для получения коэффициента диффузии ксенона рассматривались временные зависимости квадрата смещения атома  $a^2(t)$  относительно начального равновесного положения (катионной вакансии, в которую атом переходил на первых шагах моделирования). При усреднении по достаточному количеству измерений подобные зависимости подчиняются известному соотношению

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \langle a^2(t) \rangle = 6 \cdot D \cdot t,\tag{3}$$

где  $D$  — коэффициент диффузии частицы (атома ксенона). Согласно (3), реальные зависимости  $a^2(t)$  и  $\langle a^2(t) \rangle$  можно аппроксимировать прямыми вида  $y = b \cdot t + c$ , целиком либо на некоторых участках. Таким аппроксимациям соответствуют значения коэффициента диффузии  $D = b / 6$ .

По причине низкой подвижности атомов ксенона, результаты настоящей работе ограничены зависимостями  $a^2(t)$ , полученными для одиночных атомов без усреднения в узком диапазоне температур от 2890 К до 3025 К. При более низких температурах миграция ксенона не была зарегистрирована, а при более высоких модельные нанокристаллы плавилась. Эти зависимости (рис. 1) характеризуются наличием ступенек и пиков, соответствующих дискретным переходам атома ксенона между равновесными позициями (катионными вакансиями). В случае, показанном на рисунке 1, атом Хе выходит из модельного кристалла, с чем и связано резкое возрастание значений  $a^2(t)$  в конце моделирования.

Аппроксимация зависимостей  $a^2(t)$  единичными прямыми  $y = b \cdot t + c$  во всем диапазоне времен моделирования (рисунок 1а) дает значения коэффициента диффузии ксенона  $D$  в диапазоне  $4 \cdot 10^{-9} \div 2 \cdot 10^{-8}$  см<sup>2</sup>/с без выраженной зависимости от температуры. Такая интерпретация вряд ли верна, поскольку графики характеризуются скачкообразным увеличением подвижности ксенона в определенные моменты времени, которым должна соответствовать смена механизма миграции (например, в результате присоединения к атому Хе второй катионной вакансии или нескольких анионных вакансий).

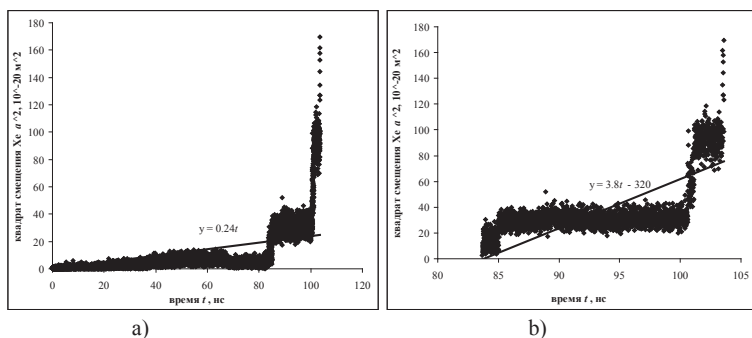


Рис. 1. Квадрат смещения атома ксенона  $a^2(t)$  при температуре  $T = 2990$  К

Участки  $a^2(t)$  с повышенной подвижностью атома ксенона можно аппроксимировать отдельными прямыми  $y = b \cdot t + c$ , как это показано на рисунке 1б. В результате получены значения  $D$ , приведенные на рис. 2 как зависимость  $\ln(D)$  от обратной температуры. Эта

зависимость описывается прямой  $\ln(D) = \ln(D_0) - E^D / kT$  с энергией активации  $E^D = (3.3 \pm 1.5)$  эВ.

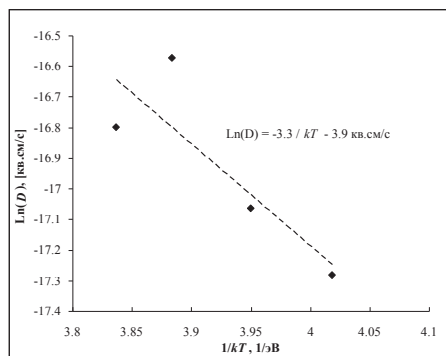


Рис. 2. Значения модельного коэффициента диффузии ксенона

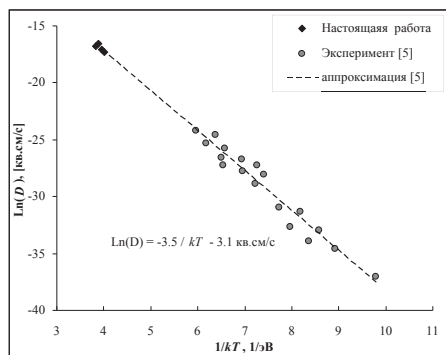


Рис. 3. Результаты моделирования в сравнении с экспериментом

Как видно из рис. 3, рассмотренная выше модельная зависимость  $\ln D(1/kT)$  не противоречит экспериментальным данным по диффузии ксенона в облученном реакторном топливе [4]. Положение расчетных точек  $\ln D(1/kT)$  соответствует линейной экстраполяции измерений [4] в область высоких температур, а энергии активации диффузии совпадают в пределах погрешностей. Тем не менее, для выяснения степени соответствия модели эксперименту необходимы уточнение расчетов, а также определение механизмов миграции ксенона при моделировании.

Таким образом, показана возможность моделирования миграции ксенона в стехиометрических кристаллах  $\text{UO}_2$  методом молекулярной динамики при доступной на сегодня производительности вычислений. Результаты позволяют предполагать наличие соответствия между моделированием и экспериментом.

### **Список источников и литературы**

1. Поташников С. И., Боярченков А. С., Некрасов К. А., Купряжкин А. Я. // ISJAE. V. 8. 2007. № 8(52). С. 43–52.
2. Govers K., Lemehov S. E., Verwerft M. // DOI 10.4028 [Электронный ресурс]. URL: [www.scientific.net/DDF.323-325.215](http://www.scientific.net/DDF.323-325.215).
3. Jackson R., Catlow C. R. A. // J. Nucl. Mater. V. 127. 1985. P. 161–166.
4. Mickleley W., Felix F. // J. Nucl. Mater. V. 42. 1972. № 3. P. 297–305.
5. Parfitt D. C., Grimes R. W. // J. Nucl. Mater. V. 392. 2009. P. 28–34.

**Д. И. Победаш,**  
доцент УрФУ, г. Екатеринбург

### **Нестабильность в СССР в 1991 г. как угроза безопасности США: М. С. Горбачев и Б. Н. Ельцин глазами американских политиков**

По мере того, как возрастала вероятность распада Советского Союза, перед администрацией Дж. Буша все более остро вставала проблема: продолжать поддерживать стремившегося сохранить СССР М. С. Горбачева или поддержать Б. Н. Ельцина и требовавшие независимости республики.

Для США одной из главных угроз, которые могли возникнуть из-за распада СССР, была возможность появления новых держав, обладающих ядерным оружием. Наряду с Россией ядерное оружие и средства его доставки могли «унаследовать» Украина, Казахстан, Беларусь. Согласно Договору о нераспространении ядерного оружия, они не могли бы считаться легитимными ядерными державами.